数理解析研究所講究録
1085 巻 1999 年 132-139

数式処理から見た行列の数値計算アルゴリズム

NTT コミュニケーション科学研究所
関川 浩 (Hiroshi SEKIGAWA) *

概 要

実対称行列の固有値を求める際には，種々のアルゴリズムを適用しやすいように，まず，三重対角行列に相似変換することが多い．本論文では，大型で疎な実対称行列を数値計算で三重対角化するときに用いる Lanczos 法を，数式処理向きに変更した方法を提案する．

1 はじめに

行列の固有値計算は応用上重要な問題である．とくに，実対称行列の固有値計算については応用上重要であるとともに，数値計算上も取り扱いやすいのが特徴である．理論的には，実対称行列は直交行列で対角化可能であり，したがって，すべての固有値は実である．ただし，四則と冪乗根の使用のみでは一般には有限ステップで対角化はできないので，実際のアルゴリズムでは適当な中間形に行列を相似変換したあと，主に反復法によって固有値を求めることになる．よく使われる手法では，中間形として実（対称）三重対角行列を用い，三重対角化には Householder 法，Lanczos 法を用いる．Householder 法，Lanczos 法とも反復法ではなく有限ステップで終了するのが特徴である．三重対角行列から固有値を求めるときには，QR 法，二分法 (Sturm) などを用いる．

本論文では，Lanczos 法を数式処理の立場から見直して変形した手法を提案する．具体的には，数値計算では誤差の面から不利なため使われない Lanczos 法の変形版が数式処理の立場からは有利であることに注目し，この変形版の出力と通常の出力の関係を明らかにする．この関係により，数式処理によって変形版の出力から通常の出力が簡単に得られることを示す．

以下，2 章で Householder 法，Lanczos 法について簡単に触れたあと，3 章で Lanczos 法の変形版が数式処理の立場から有利であることを確認する．最後に，4 章で今後の課題を挙げる．

*sekigawa@cslab.kecl.ntt.co.jp

2 数値計算による実対称行列の三重対角化

2.1 Householder 法と Lanczos 法

この節では，Householder 法と Lanczos 法について特徴を簡単に述べる．両手法とも反復法ではなく，誤差がなければ有限ステップで終了し，使用する演算は四則と開平である．開平はベクトルの長さを求めるところで必要で，具体的には，Householder 法の場合，注目したベクトルを座標軸上に写す，超平面に関する鏡映のところで，Lanczos 法の場合，ベクトルの長さを 1 にする正規化のところである．

両手法を比較すると，Householder 法の方が数値的に安定であり，与えられた行列を変形せず疎性を保ったままで計算できる点で Lanczos 法の方が大型の疎行列向きである．詳しくは，[3], [5], [1], [4] などを参照されたい．

数式処理では誤差はないこと，および，与えられた行列を変形しないことは数値計算，数式処理に関係なく有利であるので，以下，Lanczos 法を扱う．

2.2 Lanczos 法の原理

与えられた $n \times n$ の実対称行列を A とする．長さが 1 の初期ベクトル q_1 を選び，Aq_1 を，q_1 と，それに直交する単位ベクトル q_2 のスカラー倍との和で書く．すなわち，

$$Aq_1 = t_{11}q_1 + t_{21}q_2, \qquad (q_1, q_2) = 0, \qquad \|q_2\| = 1.$$

次いで，Aq_2 を，q_1, q_2 が張る部分空間内のベクトルと，それに直交する単位ベクトル q_3 のスカラー倍との和で書く．すなわち，

$$Aq_2 = t_{12}q_1 + t_{22}q_2 + t_{32}q_3, \qquad (q_1, q_3) = (q_2, q_3) = 0, \qquad \|q_3\| = 1.$$

一般に，最後に決まった単位ベクトル q_{k-1} を A で変換したベクトル Aq_{k-1} を，$q_1, \dots,$ q_{k-1} が張る部分空間内のベクトルと，その部分空間に直交する単位ベクトル q_k のスカラー倍との和で書く．すなわち，

$$Aq_{k-1} = t_{1,k-1}q_1 + \cdots + t_{k-1,k-1}q_{k-1} + t_{k,k-1}q_k,$$
$$(q_1, q_k) = \cdots = (q_{k-1}, q_k) = 0, \qquad \|q_k\| = 1 \ (k = 2, \ \dots, \ n).$$

ただし，最後の q_n については，

$$Aq_n = t_{1n}q_1 + \cdots + t_{n-1,n}q_{n-1} + t_{nn}q_n.$$

注意 2 もし，途中で $t_{k,k-1} = 0$ となった場合は，q_k として，

$$(q_1, q_k) = \cdots = (q_{k-1}, q_k) = 0, \qquad \|q_k\| = 1$$

となる任意のベクトルをとる．

このとき，以下の命題が成り立つ．

命題 1 $Q = (q_1, \ldots, q_n)$, $T = (t_{ij})$ とする．

1. Q は直交行列である．
2. $Q^{-1}AQ = T$ は実対称三重対角行列になる．すなわち，以下の形である．

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \beta_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ 0 & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

証明 q_k の決め方から，$AQ = QT$ で T は $i > j+1$ のとき $t_{ij} = 0$, すなわち，以下の形（Hessenberg 行列）になる．

$$\begin{pmatrix} * & & \cdots & & * \\ * & & & & \\ & * & & & \vdots \\ & & \ddots & & \\ 0 & & & * & * \end{pmatrix}$$

しかも，$Q^{-1} = {}^tQ$ なので，$T = {}^tQAQ$ から T は対称である． ∎

2.3 アルゴリズムの概略

命題 1 より，T は実対称三重対角行列だから，実際のアルゴリズムは以下のようになる．

1. 初期ベクトル q_1 ($\|q_1\| = 1$) を選ぶ．$Aq_1 = \alpha_1 q_1 + \beta_1 q_2$ より，

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= (q_1, Aq_1), \\ \beta_1 &= \|Aq_1 - \alpha_1 q_1\|, \\ q_2 &= (Aq_1 - \alpha_1 q_1)/\beta_1. \end{aligned}$$

2. 一般に，$Aq_k = \beta_{k-1}q_{k-1} + \alpha_k q_k + \beta_k q_{k+1}$ より，

$$\begin{aligned} \alpha_k &= (q_k, Aq_k), \\ \beta_k &= \|Aq_k - \beta_{k-1}q_{k-1} - \alpha_k q_k\|, \\ q_{k+1} &= (Aq_k - \beta_{k-1}q_{k-1} - \alpha_k q_k)/\beta_k. \end{aligned}$$

もし，途中で $\beta_k = 0$ となった場合は，q_k として，

$$(q_1, q_k) = \cdots = (q_{k-1}, q_k) = 0, \qquad \|q_k\| = 1$$

となるベクトルをとる．このとき，T はいくつかの三重対角行列にわかれる．

なお，q_k は，その -1 倍をとってもよいが，ここでは β_k が非負となるようにとっている．

さらに，実際は誤差に関する注意が必要である．局所的直交化（q_{k-1} と q_k から q_{k+1} を決定すること）は，誤差のため大域的直交性，すなわち，$(q_i, q_k) = 0$ $(1 \leq i \leq k-1)$ を失いやすい．そのため，再直交化などの処理が必要となる（[1], および，そこに挙がっている参考文献を参照）．

3　数式処理による実対称行列の三重対角化

固有値を求めようとする行列 A の成分は有理数とする．実対称行列 A を実三重対角行列 $P^{-1}AP$ に変換する際，数値計算と数式処理では，以下の違いがある．

- 数値計算では誤差の影響を少なくしたい．

  P を直交行列にとると，A の誤差（有理数を浮動小数に変換するときの誤差）が $P^{-1}AP$ にできるだけ影響しない，という点で有利である．

- 数式処理では係数爆発を避けたい．

  通常の Lanczos 法では，各ステップで新しい単位ベクトルを求めるときに開平が必要であり，係数爆発を引き起こす．対称性を捨てれば，$P \in GL_n(\mathbb{Q})$ の範囲で，有限ステップで三重対角化が可能である（たとえば，[3]）．三重対角化したのち，対称にするための開平をまとめて行うことができる．なお，三重対角行列が対称でなくても，ある条件を満たせば，二分法 (Sturm) は使える．

$P \in GL_n(\mathbb{Q})$ ととって有理数の範囲で三重対角化する手法は，数値計算の面（誤差）からは不利であるので普通は使われないものと思われる．

3.1　二分法の原理

この節では，実三重対角行列が対称でなくても，対称の位置にある成分が同符号ならば二分法が使えることを示す ([5], [2]).

T を，対称とは限らない実三重対角行列

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & 0 \\ \gamma_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \gamma_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ 0 & & & \gamma_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

とする．もし，$\beta_k = \gamma_k = 0$ となる k があれば，T はいくつかの三重対角行列にわかれるので，$\beta_k = \gamma_k = 0$ となる k はないものと仮定する．このとき，$\det(tI - T)$ の左上からとった k 次の主小行列式を $f_k(t)$ とすると，以下の漸化式が成立する．

$$f_k(t) = (t - \alpha_k)f_{k-1}(t) - \beta_{k-1}\gamma_{k-1}f_{k-2}(t)$$

よって，$f_0(t) = 1$, $f_1(t) = t - \alpha_1$ として，この漸化式を使って $f_k(t)$ を計算できる．

命題 2 T が「β_k と γ_k は同符号」という条件を満たすとき，多項式列 $\{f_k(t)\}$ は，以下の *Sturm* 列の性質を満足する．

1. $f_0(t)$ は定符号．
2. $f_k(t) = 0$ のとき $f_{k+1}(t)f_{k-1}(t) < 0$.

証明 1 は明らかなので，2 のみ証明する．β_k と γ_k は同符号であるから，$f_k(t) = 0$ のとき，漸化式より，

$$f_{k+1}(t)f_{k-1}(t) = -\beta_k\gamma_k f_{k-1}^2(t) \le 0.$$

$f_{k-1}(t) = 0$ と仮定すると，漸化式より $f_0(t) = 0$ となり矛盾． ∎

T, f_k は命題 2 の通りとしたとき，以下の定理が成り立つ．

定理 3 (Sturm の定理) α を実数とする．$f_0(\alpha)$, $f_1(\alpha)$, ..., $f_n(\alpha)$ における符号変化の回数を $N_n(\alpha)$ とすると，α より大きい T の固有値の数は，$N_n(\alpha)$ である．

証明は，[5], [2] を参照のこと．

3.2 提案方法の原理

Lanczos 法で開平が必要なのは，ベクトルの長さを 1 に正規化するところであった．そこで，正規化を行わないことを考える．A を与えられた $n \times n$ の実対称行列とする．初期

ベクトル v_1 $(\neq 0)$ を選び，Av_1 を，v_1 と，それに直交するベクトル v_2 との和で書く．すなわち，

$$Av_1 = t'_{11}v_1 + v_2, \qquad (v_1, v_2) = 0.$$

次いで，Av_2 を，v_1, v_2 が張る部分空間内のベクトルと，それに直交するベクトル v_3 との和で書く．すなわち，

$$Av_2 = t'_{12}v_1 + t'_{22}v_2 + v_3, \qquad (v_1, v_3) = (v_2, v_3) = 0.$$

一般に，最後に決まった単位ベクトル v_{k-1} を A で変換したベクトル Av_{k-1} を，v_1, $\ldots$, v_{k-1} が張る部分空間内のベクトルと，その部分空間に直交するベクトルの和で書く．すなわち，

$$\begin{aligned} Av_{k-1} = t'_{1,k-1}v_1 + \cdots + t'_{k-1,k-1}v_{k-1} + v_k,& \\ (v_1, v_k) = \cdots = (v_{k-1}, v_k) = 0 \quad (k = 2,\ \ldots\ ,\ n).& \end{aligned}$$

ただし，最後の v_n については，

$$Av_n = t'_{1n}v_1 + \cdots + t'_{n-1,n}v_{n-1} + t'_{nn}v_n.$$

途中で $v_k = 0$ とならなければ，以下の定理が成り立つ．

定理 4 $V = (v_1, \ldots, v_n)$, $T' = (t'_{ij})$ とする．

1. V の各列は直交する．

2. $V^{-1}AV = T'$ は以下の形の実三重対角行列になる．

$$\begin{pmatrix} \alpha'_1 & \beta'_1 & & & 0 \\ 1 & \alpha'_2 & \beta'_2 & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta'_{n-1} \\ 0 & & & 1 & \alpha'_n \end{pmatrix}$$

3. A, v_1 の成分がすべて有理数ならば，v_k, T' の成分もすべて有理数になる．

4. ${}^tVV$ は，(i,i) 成分が $(v_i, v_i) > 0$ の対角行列である．
D を，(i,i) 成分が $\|v_i\| = \sqrt{(v_i, v_i)}$ である対角行列とする．
$q_1 = v_1/\|v_1\|$ とした *Lanczos* 法と比較すると，

$$V = QD, \qquad T' = D^{-1}TD$$

となり，以下が成り立つ．

$$\alpha'_k = \alpha_k, \qquad \beta'_k = \beta_k^2 > 0.$$

証明 1 は作り方から明らか．

2 を証明する．$AV = VT'$ で T' は Hessenberg 行列である．${}^tVAV = {}^tVVT'$ は対称行列なので，${}^tVVT' = {}^tT'\,{}^tVV$ であり，しかも ${}^tVV$ は対角行列だから 2 が成立する．

3, 4 は，q_k と v_k が同じ向きであることに注意すれば明らか． ∎

定理 4 より，β'_k の平方根をとることにより，通常の Lanczos 法による結果を得ることができる．

3.3 アルゴリズムの概略

定理 4 より，T' は三重対角行列だから，実際のアルゴリズムは以下のようになる．

1. 成分が有理数の初期ベクトル $v_1 \neq 0$ を選ぶ．$Av_1 = \alpha'_1 v_1 + v_2$ より，

$$\begin{aligned} \alpha'_1 &= (v_1, Av_1)/(v_1, v_1), \\ v_2 &= Av_1 - \alpha'_1 v_1. \end{aligned}$$

2. 一般に，$Av_k = \beta'_{k-1} v_{k-1} + \alpha'_k v_k + v_{k+1}$ より，

$$\begin{aligned} \alpha'_k &= (v_k, Av_k)/(v_k, v_k), \\ \beta'_{k-1} &= (v_{k-1}, Av_k)/(v_{k-1}, v_{k-1}), \\ v_{k+1} &= Av_k - \beta'_{k-1} v_{k-1} - \alpha'_k v_k. \end{aligned}$$

もし，途中で $v_k = 0$ となった場合は，改めて v_k として，

$$(v_1, v_k) = \cdots = (v_{k-1}, v_k) = 0, \qquad \|v_k\| \neq 0$$

となるベクトルをとる．このとき，T' はいくつかの三重対角行列にわかれる．

3.4 例

ここでは，簡単な計算例を示す．A, v_1, q_1 を以下の通りとする．

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 5 & 7 \\ 3 & 5 & 7 & 11 \\ 5 & 7 & 11 & 13 \\ 7 & 11 & 13 & 17 \end{pmatrix}, \qquad v_1 = q_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

このとき，提案手法で計算した T', Lanczos 法で計算した T は，以下の通りとなる．

$$T' = \begin{pmatrix} 2 & 83 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{2735}{83} & \frac{81656}{6889} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{-1019165}{847181} & \frac{23934627}{104182849} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{12771}{10207} \end{pmatrix},$$

$$T = \begin{pmatrix} 2 & \sqrt{83} & 0 & 0 \\ \sqrt{83} & \frac{2735}{83} & \frac{2\sqrt{20414}}{83} & 0 \\ 0 & \frac{2\sqrt{20414}}{83} & \frac{-1019165}{847181} & \frac{537\sqrt{83}}{10207} \\ 0 & 0 & \frac{537\sqrt{83}}{10207} & \frac{12771}{10207} \end{pmatrix}.$$

上の定理 4 に述べた通り，開平を最後にまとめて行うことにより T' から T を求めることができる．

4 おわりに

Lanczos 法において，数式処理向けに，開平をできるだけ避けた形を提案した．

係数爆発の定量的な解析や，実際にどれくらいの大きさの行列まで扱えるかの確認，また，modular 法や p 進的な手法が使えるかどうかの検討は今後の課題である．

参 考 文 献

[1] F. Chatelin: *Valeurs propres de matrices*, Masson, Paris, 1988.（伊理正夫，伊理由美訳：行列の固有値，シュプリンガー・フェアラーク東京，1993.）

[2] 一松信：数値解析，朝倉書店，1982.

[3] A. S. Householder: *The Theory of Matrices in Numerical Analysis*, Blaisdell, 1964.

[4] 森正武，杉原正顯，室田一雄：線形計算（岩波講座応用数学），岩波書店，1994.

[5] J. H. Wilkinson: *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Clarendon Press, 1965.